シフト演算子の対称式と差分法(非線形可積分系の応用数理)

石森, 勇次

数理解析研究所講究録
933巻 1995年 153-165

シフト演算子の対称式と差分法

富山県立大学工学部　石森勇次　(Yuji Ishimori)

0　はじめに

微分方程式を数値的に解くための差分法として，どのような差分法がよい方法であるかについては様々な見方がある。しかし，オイラー法やルンゲ・クッタ法といった通常の方法は打ち切り誤差によるエネルギーの励起や減衰を引き起こすので，ハミルトン系の長時間計算にはエネルギーを厳密に保存してくれる差分法が望ましいと考えられる。

$2n$ 個の変数 p_i, q_i (i =1,2,$\cdots$,n) で記述される系のエネルギー（ハミルトニアン）

$$H=H(p_1,\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_n) \tag{1}$$

が保存することは，その時間微分

$$\frac{dH}{dt}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}+\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt}\right) \tag{2}$$

に運動方程式

$$\frac{dp_i}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q_i},\ \frac{dq_i}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_i}\ (i=1,2,\cdots,n) \tag{3}$$

を代入すれば直ぐにわかる。従って，エネルギーが保存するような差分法を構成するには，エネルギーの差分が0になるように(3)式の差分化を考えればよい。そのためには，時間による全微分の公式

$$\frac{dF}{dt}=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial F}{\partial x_i}\frac{dx_i}{dt} \tag{4a}$$

$$F=F(x_1(t),x_2(t),\cdots,x_n(t)) \tag{4b}$$

に対する全差分の公式を作る必要がある。本研究ではシフト演算子の対称式（permanent関数）を用いて全差分の公式を作り，エネルギーの保存する差分法を構成する。

1　差分法①

ここでは，関数の形はそのままで全差分の公式を作る。刻み幅をh とし，前進差分演算子Δ とシフト演算子E_i を次のように定義する。

$$\Delta f(t)=f(t+h)-f(t) \tag{5}$$

$$E_i=\exp\left(h\frac{\partial}{\partial t_i}\right) \tag{6}$$

n 変数関数F の差分は

$$\frac{\Delta F(x_1(t), x_2(t), \cdots, x_n(t))}{\Delta t} = \frac{1}{h}\left(E_1 E_2 \cdots E_n - 1\right) F(x_1(t_1), x_2(t_2), \cdots, x_n(t_n))\Big|_{t_1=t_2=\cdots=t_n=t} \tag{7}$$

と書かれる。従って，全微分の公式(4)の差分化は結局 $E_1E_2\cdots E_n$-1 をどのように変形するかという問題になる。Hirota[1] は差分演算子E_i -1と 1 変数の平均化演算子$(E_i+1)/2$で表すことを試みているが，変数の数が多くなると複雑になってしまう（ただし，時間の原点が$h/2$だけずれている）。シフト演算子の変形といった形での研究ではないが，何人かの研究者によって全差分の公式が導かれている。Neuman&Tourassis[2] 及びGotusso[3] はある差分公式を提案し，エネルギーの保存するようなラグランジュの運動方程式の差分化を行っている。それらの公式をシフト演算子の変形という形で表すと，各々

$$\begin{aligned} &E_1 E_2 \cdots E_n - 1 \\ &= \left(E_1 E_2 \cdots E_n - E_2 E_3 \cdots E_n\right) + \left(E_2 E_3 \cdots E_n - E_3 E_4 \cdots E_n\right) + \cdots + \left(E_n - 1\right) \\ &= \left(E_1 - 1\right) E_2 \cdots E_n + \left(E_2 - 1\right) E_3 \cdots E_n + \cdots + \left(E_n - 1\right) \end{aligned} \tag{8}$$

及び

$$\begin{aligned} &E_1 E_2 \cdots E_n - 1 \\ &= \left(E_1 - 1\right) + \left(E_2 - 1\right) E_1 + \cdots + \left(E_n - 1\right) E_1 \cdots E_{n-1} \end{aligned} \tag{9}$$

である。Gear[4] も暗に同じような差分公式を用いてエネルギーの保存する運動方程式(3)の差分化を行っている。(8)または(9)は添字1～n を並び替えても成り立つので，n ! 個の変形が可能であり，それらをいくつか組み合わせた変形も可能である。Itoh&Abe[5] はいくつか組み合わせたものを採用して(3)式の差分化を行っている。Potts[6]は n ! 個の並びを全て考慮してラグランジュの運動方程式の差分化を行っている。

ここではシフト演算子の対称式（permanent 関数）を使った変形を提案する。それから得られる全差分の公式は，本質的には Potts の公式と等価であるが，より明確な表示になっている。即ち，次のような変形を考える（証明略）。

$$E_1 E_2 \cdots E_n - 1 = \sum_{i=1}^{n} \left(E_i - 1\right) M(E_1, \cdots, E_{i-1}, E_{i+1}, \cdots, E_n) \tag{10}$$

ここで，

$$M(a_1, a_2, \cdots, a_{n-1}) = \frac{1}{n!} \sum_{j=1}^{n} \mathrm{per} \begin{array}{l} \left[\begin{array}{cccc} a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-1} \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{array}\right] \begin{array}{l} \left.\vphantom{\begin{array}{c} a\\ \vdots \\ a \end{array}}\right\} n-j \\ \left.\vphantom{\begin{array}{c} 1\\ \vdots \\ 1 \end{array}}\right\} j-1 \end{array} \end{array} \tag{11}$$

である。per は行列の permanent (plus determinant) を表す[7]。従って，M は対称式になっている。対称な形ということは，全ての変数を対等に扱うことを意味する。この等式(11)より全差分の公式

$$\frac{\Delta F}{\Delta t}=\sum_{i=1}^{n}\delta[x_i]\mu[x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n]F\frac{\Delta x_i}{\Delta t} \tag{12}$$

$$\delta[x_i]F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$$
$$=\frac{(E_i-1)F(x_1(t),\cdots,x_{i-1}(t),x_i(t_i),x_{i+1}(t),\cdots,x_n(t)\big|_{t_i=t}}{\Delta x_i(t)} \tag{13}$$

$$\mu[x_i,x_j,\cdots,x_m]F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$$
$$=M(E_i,E_j,\cdots,E_m)F(x_1(t),\cdots,x_i(t_i),\cdots,x_j(t_j),\cdots,x_m(t_m),\cdots,x(t))\big|_{t_i=t_j=\cdots=t_m=t} \tag{14}$$

を得る。ここで，$\delta[\,]$ は偏差分演算子である。また，$\mu[\,]$ は多変数の平均化演算子である。例えば，

$$x_i^k=x_i(t)\big|_{t=kh} \tag{15}$$

$$\mu[x_1]F(x_1,x_2,\cdots,x_n)=\frac{1}{2}\left\{F(x_1^{k+1},x_2^k,\cdots,x_n^k)+F(x_1^k,x_2^k,\cdots,x_n^k)\right\} \tag{16a}$$

$$\mu[x_1,x_2]F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$$
$$=\frac{1}{6}\left\{2F(x_1^{k+1},x_2^{k+1},x_3^k,\cdots,x_n^k)+F(x_1^{k+1},x_2^k,x_3^k,\cdots,x_n^k)\right.$$
$$\left.+F(x_1^k,x_2^{k+1},x_3^k,\cdots,x_n^k)+2F(x_1^k,x_2^k,x_3^k,\cdots,x_n^k)\right\} \tag{16b}$$

であり，

$$\mu[x_1,x_2,\cdots,x_n]1=1 \tag{17a}$$

$$\mu[x_1,x_2,\cdots,x_n]F(x_1,x_2,\cdots,x_{n-1})=\mu[x_1,x_2,\cdots,x_{n-1}]F(x_1,x_2,\cdots,x_{n-1}) \tag{17b}$$

等の性質が成り立つ。

全差分の公式(12)を使って，エネルギー(1)の差分をとると

$$\frac{\Delta H}{\Delta t}=\sum_{i=1}^{n}\left\{\delta[p_i]\mu[p_1,\cdots,p_{i-1},p_{i+1},\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_n]H\frac{\Delta p_i}{\Delta t}\right.$$
$$\left.+\delta[q_i]\mu[p_1,\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_{i-1},q_{i+1},\cdots,q_n]H\frac{\Delta q_i}{\Delta t}\right\} \tag{18}$$

となるので，運動方程式(3)の差分化として差分方程式

$$\frac{\Delta p_i}{\Delta t}=-\delta[q_i]\mu[p_1,\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_{i-1},q_{i+1},\cdots,q_n]H$$
$$\frac{\Delta q_i}{\Delta t}=\delta[p_i]\mu[p_1,\cdots,p_{i-1},p_{i+1},\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_n]H \tag{19}$$

を採用すれば，直ちにエネルギー保存則

$$\frac{\Delta H}{\Delta t}=0 \tag{20}$$

を得る。n =1の場合，エネルギーが

$$H=\frac{1}{2}p^2+V(q) \tag{21}$$

のような形であれば，差分法(19)もGear[4]の差分法も同じでGreenspan[8]の差分法と一致する。

以下で，この差分法のいくつかの問題点を議論する。

【注１】chain rule について

まず chain rule と相性が悪い。例えば，$F(x,y)=F(G(x,y))$ のとき，

$$\begin{aligned}\frac{\Delta F}{\Delta t}&=\delta[x]\mu[y]F\frac{\Delta x}{\Delta t}+\delta[y]\mu[x]F\frac{\Delta y}{\Delta t}\\&=\frac{\Delta F}{\Delta G}\frac{\Delta G}{\Delta t}=\frac{\Delta F}{\Delta G}\left(\delta[x]\mu[y]G\frac{\Delta x}{\Delta t}+\delta[y]\mu[x]G\frac{\Delta y}{\Delta t}\right)\end{aligned} \tag{22}$$

であるが，

$$\delta[x]\mu[y]F\neq\frac{\Delta F}{\Delta G}\delta[x]\mu[y]G,\quad \delta[y]\mu[x]F\neq\frac{\Delta F}{\Delta G}\delta[y]\mu[x]G \tag{23}$$

である。これは，例えば以下の例で見られるように角運動が保存しない等の欠点をもたらす。中心力ポテンシャルを持つハミルトン系

$$\begin{aligned}&H=\frac{1}{2}p_x^2+\frac{1}{2}p_y^2+V(r),\quad r=\sqrt{x^2+y^2}\\&\frac{dp_x}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial x}=-\frac{\partial V}{\partial x}=-\frac{dV}{dr}\frac{\partial r}{\partial x}=-\frac{dV}{dr}\frac{x}{r}\\&\frac{dp_y}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial y}=-\frac{\partial V}{\partial y}=-\frac{dV}{dr}\frac{\partial r}{\partial y}=-\frac{dV}{dr}\frac{y}{r}\\&\frac{dx}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_x}=p_x\quad \frac{dy}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_y}=p_y\end{aligned} \tag{24}$$

では，角運動量

$$J=xp_y-yp_x \tag{25}$$

が保存する。しかし，差分方程式

$$
\begin{aligned}
\frac{\Delta p_x}{\Delta t} &= -\delta[x]\mu[p_x, p_y, y]H = -\delta[x]\mu[y]V \\
\frac{\Delta p_y}{\Delta t} &= -\delta[y]\mu[p_x, p_y, x]H = -\delta[y]\mu[x]V \\
\frac{\Delta x}{\Delta t} &= \delta[p_x]\mu[p_y, x, y]H = \mu[p_x]p_x \\
\frac{\Delta y}{\Delta t} &= \delta[p_y]\mu[p_x, x, y]H = \mu[p_y]p_y
\end{aligned}
\tag{26}
$$

では，

$$
\frac{\Delta J}{\Delta t} = (\mu[y]y)(\delta[x]\mu[y]V) - (\mu[x]x)(\delta[y]\mu[x]V) \tag{27}
$$

となり，特別なポテンシャル

$$
V = ar^2 + br^4 \tag{28}
$$

の場合を除き，一般に角運動量は保存しない。保存させるには，ポテンシャル V が r^2 の関数として１度 chain rule を使い，

$$
\frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{\Delta V}{\Delta r^2}\frac{\Delta r^2}{\Delta t} = \frac{\Delta V}{\Delta r}\left(\frac{\mu[x]x}{\mu[r]r}\frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{\mu[y]y}{\mu[r]r}\frac{\Delta y}{\Delta t}\right) \tag{29}
$$

より，

$$
\begin{aligned}
\frac{\Delta p_x}{\Delta t} &= -\frac{\Delta V}{\Delta r}\frac{\mu[x]x}{\mu[r]r} \quad (\neq -\delta[x]\mu[y]V) \\
\frac{\Delta p_y}{\Delta t} &= -\frac{\Delta V}{\Delta r}\frac{\mu[y]y}{\mu[r]r} \quad (\neq -\delta[y]\mu[x]V)
\end{aligned}
\tag{30}
$$

としなければいけない。

【注２】変数変換

図１で示すように連続時間系を差分化してから変数変換するのと，変数変換してから差分化するのでは，一般に異なる離散時間系になる。即ち，どの変数で記述するかによって差分法が異なり，望ましい変数を探す必要がある。

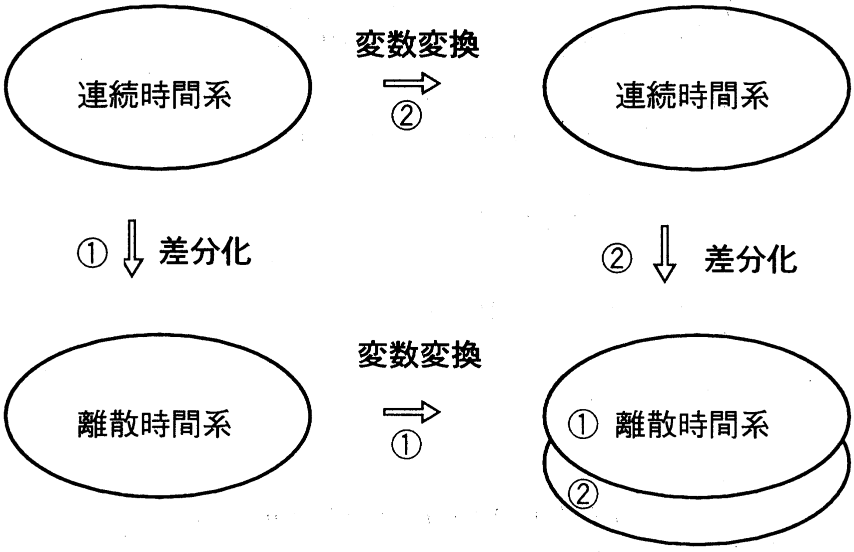

図 1　どの変数で差分化を行うか？

中心力ポテンシャルをもつハミルトン系に対しては，極座標で記述した系

$$
\begin{aligned}
&H=\frac{1}{2}p_r^2+\frac{1}{2r^2}p_\theta^2+V(r)\\
&\frac{dp_r}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial r}=\frac{1}{r^3}p_\theta^2-\frac{dV}{dr},\quad \frac{dp_\theta}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial \theta}=0\\
&\frac{dr}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_r}=p_r,\quad \frac{d\theta}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_\theta}=\frac{1}{r^2}p_\theta
\end{aligned}
\tag{31}
$$

に対する差分法

$$
\begin{aligned}
&\frac{\Delta p_r}{\Delta t}=-\delta[r]\mu[p_r,p_\theta,\theta]H=-\left(\delta[r]\frac{1}{2r^2}\right)\left(\mu[p_\theta]p_\theta^2\right)-\delta[r]V(r)\\
&\frac{\Delta p_\theta}{\Delta t}=-\delta[\theta]\mu[p_r,p_\theta,r]H=0\\
&\frac{\Delta r}{\Delta t}=\delta[p_r]\mu[p_\theta,r,\theta]H=\mu[p_r]p_r,\quad \frac{\Delta\theta}{\Delta t}=\delta[p_\theta,r,\theta]H=\left(\mu[r]\frac{1}{r^2}\right)\mu[p_\theta]p_\theta
\end{aligned}
\tag{32}
$$

を使えば，角運動量は保存する。

完全可積分なハミルトン系では，作用・角変数で表された微分方程式を差分化するのが理想的であるが，そもそもそのようなことをしても意味がない。しかし，摂動系の差分化では，意味のあることかもしれない。

【注 3】Lax 方程式

等式(10)を使って，Lax 方程式

$$\frac{dL}{dt}=BL-LB \tag{33}$$

の差分化を考えてみる。例えば，Toda 方程式の場合

$$L=\begin{bmatrix} b_1 & a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_1 & b_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & b_{n-1} & a_{n-1} \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n-1} & b_n \end{bmatrix},\ B=\begin{bmatrix} 0 & -a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_1 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & -a_{n-1} \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n-1} & 0 \end{bmatrix} \tag{34}$$

で与えられる。ここで，

$$a_i=\frac{1}{2}\exp\left(\frac{q_i-q_{i+1}}{2}\right),\ b_i=\frac{1}{2}p_i \tag{35}$$

である。Lax 方程式(33)で表される系の保存量は

$$I_m=\mathrm{tr}\left(L^m\right) \tag{36}$$

で与えられる。I_m が保存することは，

$$\begin{aligned}\frac{dI_m}{dt}&=\mathrm{tr}\left(\frac{dL}{dt}L^{m-1}+L\frac{dL}{dt}L^{m-2}+\cdots+L^{m-1}\frac{dL}{dt}\right)=m\mathrm{tr}\left(\frac{dL}{dt}L^{m-1}\right)\\&=m\mathrm{tr}\left((BL-LB)L^{m-1}\right)=m\mathrm{tr}\left(B(L^m-L^m)\right)=0\end{aligned} \tag{37}$$

より，容易にわかる。

I_m の差分を計算する。

$$\begin{aligned}\frac{\Delta I_m}{\Delta t}&=\frac{1}{\Delta t}\left(E_1E_2\cdots E_m-1\right)\mathrm{tr}\left(L(t_1)L(t_2)\cdots L(t_m)\right)\Big|_{t_1=t_2=\cdots=t_m=t}\\&=\sum_{i=1}^{m}\frac{\left(E_i-1\right)}{\Delta t}M(E_1,\cdots,E_{i-1},E_{i+1},\cdots,E_m)\mathrm{tr}\left(L(t_1)L(t_2)\cdots L(t_m)\right)\Big|_{t_1=t_2=\cdots=t_m=t}\\&=m\mathrm{tr}\left(\frac{\Delta L}{\Delta t}M(E_2,\cdots,E_m)L(t_2)\cdots L(t_m)\Big|_{t_2=\cdots=t_m=t}\right)\end{aligned} \tag{38}$$

差分方程式として

$$\frac{\Delta L}{\Delta t}=M^{\#}(E_0,E_1)\left(B(t_0)L(t_1)-L(t_1)B(t_0)\right)\Big|_{t_0=t_1=t}\quad (M^{\#}(E_0,E_1)=M^{\#}(E_1,E_0)) \tag{39}$$

を仮定すると（$M^{\#}$は未知関数である）

$$\frac{\Delta I_m}{\Delta t} = m\mathrm{tr}\left\{ M^{\#}(E_0, E_1) M(E_2, \cdots, E_m) B(t_0) \left(L(t_1)L(t_2)\cdots L(t_m) - L(t_2)\cdots L(t_m)L(t_1) \right) \Big|_{t_0=t_1=\cdots=t_m=t} \right\} \tag{40}$$

となる。

先ず，$m=1$ を考える。I_1 は運動量を表す。

$$\frac{\Delta I_1}{\Delta t} = \mathrm{tr}\left\{ M^{\#}(E_0, E_1) B(t_0) \left(L(t_1) - L(t_1) \right) \Big|_{t_0=t_1=t} \right\} = 0 \tag{41}$$

なので，$M^{\#}$の関数形によらず運動量は保存する。従って，オイラー法 ($M^{\#}=1$) でも運動量は保存する。

次に，$m=2$ を考える。I_2 はエネルギーを表す。

$$\frac{\Delta I_2}{\Delta t} = 2\mathrm{tr}\left\{ M^{\#}(E_0, E_1) M(E_2) B(t_0) \left(L(t_1)L(t_2) - L(t_2)L(t_1) \right) \Big|_{t_0=t_1=t_2=t} \right\} \tag{42}$$

なので，

$$M^{\#}(E_0, E_1) = M(E_0) M(E_1) \tag{43}$$

とすれば，

$$\frac{\Delta I_2}{\Delta t} = 2\mathrm{tr}\left\{ M(E_0) B(t_0) \left(M(E_1)L(t_1)M(E_2)L(t_2) - M(E_2)L(t_2)M(E_1)L(t_1) \right) \Big|_{t_0=t_1=t_2=t} \right\} = 0 \tag{44}$$

となり，エネルギーは保存する。

$m=3$ のとき，

$$\frac{\Delta I_3}{\Delta t} = 3\mathrm{tr}\left\{ M(E_0) B(t_0) M(E_1) M(E_2, E_3) \left(L(t_1)L(t_2)L(t_3) - L(t_2)L(t_3)L(t_1) \right) \Big|_{t_0=t_1=t_2=t_3=t} \right\} \tag{45}$$

である。

$$M(E_2, E_3) \neq M(E_2) M(E_3) \tag{46}$$

なので，一般に

$$\frac{\Delta I_3}{\Delta t} \neq 0 \tag{47}$$

となり，I_3 は保存しない。

2　差分法②

関数を平均化してから，全差分の公式を作ることを考える。n 変数関数F をr 個の点

$$t-(r-1)h,\ t-(r-2)h,\ \cdots, t-h,\ t\ \ (r \geq n) \tag{48}$$

で，次のように平均化する。

$$\nu_r[x_1,x_2,\cdots,x_n]F(x_1,x_2,\cdots,x_n)=N_r(E_1,E_2,\cdots,E_n)F((x(t_1),x(t_2),\cdots,x(t_n)))\Big|_{t_1=t_2=\cdots=t_n=t} \tag{49}$$

$$N_r(E_1,E_2,\cdots,E_n)=\frac{1}{r!}\,\mathrm{per}\begin{bmatrix} 1 & E_1^{-1} & \cdots & E_1^{-(r-1)} \\ 1 & E_2^{-1} & \cdots & E_1^{-(r-1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & E_n^{-1} & \cdots & E_n^{-(r-1)} \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}\begin{matrix} \left.\vphantom{\begin{matrix}1\\1\\\vdots\\1\end{matrix}}\right\} n \\ \left.\vphantom{\begin{matrix}1\\1\\\vdots\\1\end{matrix}}\right\} r-n \end{matrix} \tag{50}$$

$\nu_r[\;]$ は平均化演算子であり，N_r は後退シフト演算子の対称式である。例えば，

$$\nu_r[x_1]F(x_1)=\frac{1}{r}\left(F(x_1^k)+F(x_1^{k-1})+\cdots+F(x_1^{k-r+1})\right) \tag{51a}$$

$$\begin{aligned}&\nu_3[x_1,x_2]F(x_1,x_2)\\&=\frac{1}{6}\left(F(x_1^k,x_2^{k-1})+F(x_1^{k-1},x_2^k)+F(x_1^k,x_2^{k-2})+F(x_1^{k-2},x_2^k)+F(x_1^{k-1},x_2^{k-2})+F(x_1^{k-2},x_2^{k-1})\right)\end{aligned} \tag{51b}$$

であり，

$$\nu_r[x_1,x_2,\cdots,x_n]1=1 \tag{52a}$$

$$\nu_r[x_1,x_2,\cdots,x_n]F(x_1,x_2,\cdots,x_{n-1})=\nu_r[x_1,x_2,\cdots,x_{n-1}]F(x_1,x_2,\cdots,x_{n-1}) \tag{52b}$$

等の性質が成り立つ。

等式

$$\left(E_1E_2\cdots E_n-1\right)N_r(E_1,E_2,\cdots,E_n)=\sum_{i=1}^{n}\frac{E_i-E_i^{-(r-1)}}{r}N_{r-1}(E_1,\cdots,E_{i-1},E_{i+1},\cdots,E_n) \tag{53}$$

より，次のような全差分の公式を得る。

$$\frac{\Delta\nu_r[x_1,\cdots,x_n]F(x_1,\cdots,x_n)}{\Delta t}=\sum_{i=1}^{n}\delta_{(r)}[x_i]\nu_{r-1}[x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n]F\frac{\Delta_{(r)}x_i}{\Delta_{(r)}t} \tag{54}$$

ここで，

$$\Delta_{(r)}f(t)=f(t+h)-f(t-(r-1)h) \tag{55}$$

$$\delta_{(r)}[x_i]F(x_1,\cdots,x_n)=\frac{\left(E_i-E_i^{-(r-1)}\right)F(x_1(t),\cdots,x_{i-1}(t),x_i(t_i),x_{i+1}(t),\cdots,x_n(t))\Big|_{t_i=t}}{\Delta_{(r)}x_i(t)} \tag{56}$$

である。

運動方程式(3)の差分化として，差分方程式

$$\frac{\Delta_{(r)}p_i}{\Delta_{(r)}t}=-\delta_{(r)}[q_i]\nu_{r-1}[p_1,\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_{i-1},q_{i+1},\cdots,q_n]H$$
$$\frac{\Delta_{(r)}q_i}{\Delta_{(r)}t}=\quad\delta_{(r)}[p_i]\nu_{r-1}[p_1,\cdots,p_{i-1},p_{i+1},\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_n]H \tag{57}$$

を採用すれば，全差分の公式(54)より

$$\frac{\Delta\nu_r[p_1,\cdots,p_n,q_1,\cdots,q_n]H}{\Delta t}=0 \tag{58}$$

を得る。即ち，平均化されたエネルギーが保存する。この差分法は多段法であり，$r\geqq 2n$ より一般に多くの点での変数の値が必要となるが，エネルギー関数の形によってrの値は減らすことができる。例えば,

$$H=T(p_1,\cdots,p_n)+V(q_1,\cdots,q_n) \tag{59}$$

の場合，$r\geqq n$ となり,

$$H=\sum_{i=1}^{n}T_i(p_i)+\sum_{i<j}V_{ij}(q_i,q_j) \tag{60}$$

の場合，$r\geqq 2$ となる。

n 変数の関数Fを

$$F(x_1,\cdots,x_n)=G(y_1,\cdots,y_s),\ \ y_i=y_i(x_1,\cdots,x_n) \tag{61}$$

と見なして，関数の平均化をy_iについて行って差分法を構成することもできる。即ち,

$$\frac{\Delta\nu_r[y_1,\cdots,y_s]G}{\Delta t}=\sum_{j=1}^{s}\delta_{(r)}[y_j]\nu_{r-1}[y_1,\cdots,y_{j-1},y_{j+1},\cdots,y_s]G\frac{\Delta_{(r)}y_j}{\Delta_{(r)}t}\quad(r\geq s) \tag{62}$$

$$\frac{\Delta_{(r)}y_j}{\Delta_{(r)}t}=\sum_{i=1}^{n}\delta_{(r)}[x_i]\mu_{(r)}[x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n]y_j\frac{\Delta_{(r)}x_i}{\Delta_{(r)}t} \tag{63}$$

より差分法を構成することもできる。ここで，次のような全差分の公式を使った。

$$\frac{\Delta_{(r)}F(x_1,\cdots,x_n)}{\Delta_{(r)}t}=\sum_{i=1}^{n}\delta_{(r)}[x_i]\mu_{(r)}[x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n]F\frac{\Delta_{(r)}x_i}{\Delta_{(r)}t} \tag{64}$$

$$\begin{aligned}&\mu_{(r)}[x_i,x_j,\cdots,x_m]F(x_1,\cdots,x_n)\\&=M_{(r)}(E_i,E_j,\cdots,E_m)F(x(t),\cdots,x(t_i),\cdots,x(t_j),\cdots,x(t_m),\cdots,x(t))\Big|_{t_i=t_j=\cdots=t_m=t}\end{aligned} \tag{65}$$

$$M_{(r)}(a_1, a_2, \cdots, a_{n-1}) = \frac{1}{n!}\,\mathrm{per}\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-1} \\ a_1^{-(r-1)} & a_2^{-(r-1)} & \cdots & a_{n-1}^{-(r-1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_1^{-(r-1)} & a_2^{-(r-1)} & \cdots & a_{n-1}^{-(r-1)} \end{bmatrix}\begin{matrix} \left.\vphantom{\begin{matrix}a\\a\\a\end{matrix}}\right\} n-k \\ \left.\vphantom{\begin{matrix}a\\a\\a\end{matrix}}\right\} k-1 \end{matrix} \tag{66}$$

公式(64)は全差分の公式(12)と似た公式であり，r =1 のときは(12)と同じになる。公式(62)及び(63)を使って運動方程式(3)の差分化を考えると，例えば,

$$\frac{\Delta \nu_r[H]H}{\Delta t} = 0 \quad (\mathrm{r} \geq 1) \tag{67}$$

となるような差分法は

$$\begin{aligned} \frac{\Delta_{(r)} p_i}{\Delta_{(r)} t} &= -\,\delta_{(r)}[q_i]\mu_{(r)}[p_1, \cdots, p_n, q_1, \cdots, q_{i-1}, q_{i+1}, \cdots, q_n]H \\ \frac{\Delta_{(r)} q_i}{\Delta_{(r)} t} &= \quad \delta_{(r)}[p_i]\mu_{(r)}[p_1, \cdots, p_{i-1}, p_{i+1}, \cdots, p_n, q_1, \cdots, q_n]H \end{aligned} \tag{68}$$

で与えられる。この例のように，どのような変数について平均化したのかによっては，r の値を小さくすることができる。

【注 4】ラグランジュの運動方程式

ハミルトンの運動方程式ではなくて，ラグランジュの運動方程式をエネルギーが保存するように差分化することを考える。ラグランジアンとして

$$L = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} T_{ij}(q_1, \cdots, q_n)\dot{q}_i\dot{q}_j - V(q_1, \cdots, q_n) \quad (T_{ij} = T_{ji}) \tag{69}$$

を考えると，オイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \tag{70}$$

より，運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\sum_{j=1}^{n} T_{ij}\dot{q}_j - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial T_{jk}}{\partial q_i}\dot{q}_j\dot{q}_k + \frac{\partial V}{\partial q_i} = 0 \tag{71}$$

となる。エネルギー

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} T_{ij}(q_1, \cdots, q_n)\dot{q}_i\dot{q}_j + V(q_1, \cdots, q_n) \tag{72}$$

が保存することは,

$$\frac{dH}{dt}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{d}{dt}\sum_{j=1}^{n}T_{ij}\dot{q}_j-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial T_{jk}}{\partial q_i}\dot{q}_j\dot{q}_k+\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)\dot{q}_i=0 \tag{73}$$

のように，運動方程式から直接確かめられる。離散時間系でエネルギーでq_iだけで表すには，速度を表すために最低限２点必要である。そのため，T_{ij} とV も２点で表したほうが都合がよい。もし２点で表したエネルギーを

$$\overline{H}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\nu_2[T_{ij}]T_{ij}\frac{\triangledown q_i}{\triangledown t}\frac{\triangledown q_j}{\triangledown t}+\nu_2[V]V \tag{74}$$

と置くと，

$$\begin{aligned}\frac{\Delta\overline{H}}{\Delta t}=\sum_{i=1}^{n}\Bigg\{&\frac{1}{\Delta t}\Delta\sum_{j=1}^{n}\nu_2[T_{ij}]T_{ij}\frac{\Delta q_j}{\Delta t}\\&-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\left(\delta_{(2)}[q_i]\mu_{(2)}[q_1,\cdots,q_{i-1},q_{i+1},\cdots,q_n]T_{jk}\right)\frac{\triangledown q_j}{\triangledown t}\frac{\Delta q_k}{\Delta t}\\&+\delta_{(2)}[q_i]\mu_{(2)}[q_1,\cdots,q_{i-1},q_{i+1},\cdots,q_n]V\Bigg\}\frac{\Delta_{(2)}q_i}{\Delta_{(2)}t}\end{aligned} \tag{75}$$

となるので，差分方程式として

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\Delta t}\Delta\sum_{j=1}^{n}\nu_2[T_{ij}]T_{ij}\frac{\Delta q_j}{\Delta t}\\&-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\left(\delta_{(2)}[q_i]\mu_{(2)}[q_1,\cdots,q_{i-1},q_{i+1},\cdots,q_n]T_{jk}\right)\frac{\triangledown q_j}{\triangledown t}\frac{\Delta q_k}{\Delta t}\\&+\delta_{(2)}[q_i]\mu_{(2)}[q_1,\cdots,q_{i-1},q_{i+1},\cdots,q_n]V=0\end{aligned} \tag{76}$$

を採用すればエネルギーは保存する。

3　おわりに

多変数のハミルトン系に対して，エネルギーが厳密に保存するような差分法を構成するには，多変数の全差分の公式を作らなければいけない。本研究では，シフト演算子のpermanent関数（対称式）で表される多変数の平均化演算子を導入すればそのような差分公式を作ることができ，差分法を構成できることを示した。残念ながらソリトン方程式のような非線形可積分系との関連では，多変数の平均化演算子が１変数の平均化演算子の積で書けないために，連続時間系の保存量を全てそのままの形で保存させるような差分法は構成できない。この問題を含めたいくつかの欠点をなくするには，多変数関数の差分学をうまく構成していく必要があると思われる。

参考文献

[1] R.Hirota : Difference Analogues of Nonlinear Evolution Equations in Hamiltoian Form, Technical Report No. A-12 (1982), Dept. of Appl. Math., Hiroshima Univ., Higashi-Hiroshima.
[2] C.P.Neumann & V.D.Tourasis : Discrete Dynamic Robot Models, IEEE Trans. Systems ,Man, Cybernet. SMC-15(1985)193-204.
[3] L.Gotusso : On the Energy Theorem for the Lagrange Equations in the Discrete Case,Appl. Math. Comp. 17(1985)129-136.
[4] C.W.Gear : Invariants and numerical methods for ODEs, Physica D 60(1992)303-310.
[5] T.Itoh & K.Abe : Hamiltonian-Conserving Discrete Canonical Equations Based on Variational Difference Quotients, J. Comp. Phys. 77(1988)85-102.
[6] R.B.Potts : Discrete Lagrange Equations, Bull. Austral. Math. Soc. 3(1988)227-233.
[7] H.Minc : *Permanents* , Addison-Wesley, Reading, Mass., 1978.
[8] D.Greenspan : Conservative Numerical Methods for $\ddot{x} = f(x)$, J. Comp. Phys. 56(1984)28-41.